

PYRIDAZINONES AND INSECTICIDE, ACARICIDE AND NEMATOCIDE

Patent number: JP63159373
Publication date: 1988-07-02
Inventor: NUMATA TATSUO; ISHII SHIGERU; HIRATA
KIMINORI; KUDO MASAKI
Applicant: NISSAN CHEMICAL IND LTD
Classification:
- international: C07D401/12; A01N43/58; C07D237/14; C07D237/16;
C07D403/12; C07D405/12; C07D409/12; C07D413/12;
C07D417/12; C07D237/18
- european:
Application number: JP19860306395 19861224
Priority number(s): JP19860306395 19861224

Abstract of JP63159373

NEW MATERIAL: A compound expressed by formula I [R is 1 -6C alkyl; A is halogen, 1 -4C alkyl and alkoxy, etc.; Y is O or S; R<1> and R<2> are H or 1 -4C alkyl; B is formula II (R<3> and R<4> are same as R<1> and R<2>), m is 0 or 1; R<6> is halogen, 1 -4C alkyl and alkoxy, etc.; n is 0 -4; Y is formula V (R<7> is same as R<1> and R<2>), formula VI (R<8> is same as R<7>), formula VII, etc.; Q is phenyl, pyridyl, pyridazyl, etc.]. EXAMPLE: 2 -tert-Butyl-4-chloro-5-{4-[1-(4-chlorophenyl)ethyloxy]benzyl} hio} -3 (2H)- pyridazinone. USE: An agricultural and horticultural insecticide, acaricide, nematocide and expellent against mites parasitic on animals. PREPARATION: A compound expressed by formula III (X<1> is halogen, OH or SH) is reacted with a compound expressed by formula IV (X<2> is X<1>; X<2> is OH or SH when X<1> is halogen and X<2> is halogen when X<1> is OH or SH) in the presence of a hydrogen halide adsorbent to afford the compound expressed by formula I.

Data supplied from the esp@cenet database - Worldwide

⑫ 公開特許公報(A)

昭63-159373

⑬ Int. Cl.⁴

C 07 D 237/14
A 01 N 43/58
C 07 D 237/16
237/18
401/12

識別記号

2 3 7

庁内整理番号

7166-4C
B-7215-4H
7166-4C
7166-4C
6761-4C

⑭ 公開 昭和63年(1988)7月2日

※審査請求 未請求 発明の数 2 (全12頁)

⑮ 発明の名称 ビリダジノン類および殺虫、殺ダニ、殺線虫剤

⑯ 特 願 昭61-306395

⑰ 出 願 昭61(1986)12月24日

⑱ 発 明 者 沼 田 達 雄 千葉県船橋市坪井町722番地1 日産化学工業株式会社中央研究所内

⑲ 発 明 者 石 井 茂 千葉県船橋市坪井町722番地1 日産化学工業株式会社中央研究所内

⑳ 発 明 者 平 田 公 典 埼玉県南埼玉郡白岡町大字白岡1470 日産化学工業株式会社生物化学研究所内

㉑ 発 明 者 工 藤 正 毅 埼玉県南埼玉郡白岡町大字白岡1470 日産化学工業株式会社生物化学研究所内

㉒ 出 願 人 日産化学工業株式会社 東京都千代田区神田錦町3丁目7番地1
最終頁に続く

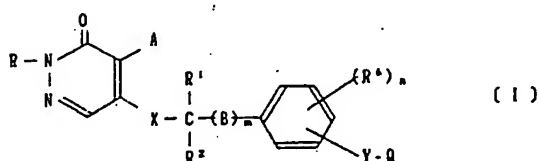
明 細 書

1. 発明の名称

ビリダジノン類および殺虫、殺ダニ、殺線虫剤

2. 特許請求の範囲

(1) 一般式(1):

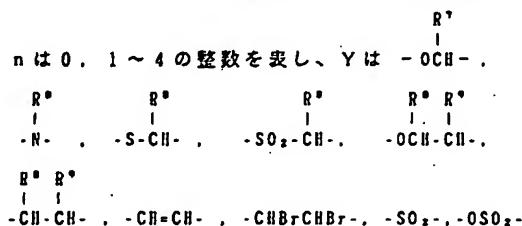


で表される 3(2H)-ビリダジノン誘導体。

(式中、Rは炭素数1～6のアルキル基を表し、
Aはハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、
炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のアルキルチオ基または水素原子を表し、Xは酸素原子または硫黄原子を表し、R'およびR''は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1～4のアル

キル基を表し、Bは、 $\begin{smallmatrix} R^3 & R^4 \\ | & | \\ -C & =C- \end{smallmatrix}$ を表し、R³

およびR⁴は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1～4のアルキル基を表し、mは0または1を表し、R⁵はハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のハロアルキル基またはニトロ基を表し、

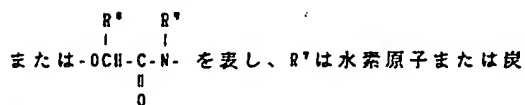
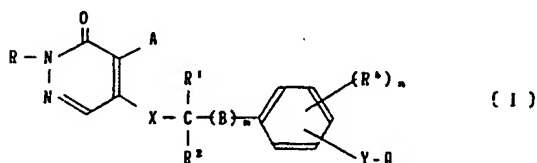


または $\begin{smallmatrix} R^6 & R^6 \\ | & | \\ -OCH-C-N- \\ | \\ O \end{smallmatrix}$ を表し、R⁷は水素原子または炭

素数1～4のアルキル基を表し、(但し、Qがフェニル基のとき水素原子は含まない) R⁶およびR⁸は水素原子または炭素数1～4のアルキル基を表し、Qは無置換もしくは置換基を有するフェニル基、ビリジル基、ビリダジル基、ビリミジル基、ピラジル基、チエニル基、フリル基、ピロリ

ル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、イソチアゾリル基、イソオキサゾリル基、トリアゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジル基、ナフチル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、ベンゾチエニル基、ベンズオキサゾリル基またはベンズチアゾリル基を表し、置換基としては、ハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のハロアルキル基、炭素数1～4のアルキルチオ基、アルキルスルホニル基またはニトロ基より選ばれる。)。

(2) 一般式(1)：



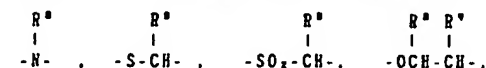
炭素数1～4のアルキル基を表し、(但し、Qがフェニル基のとき水素原子は含まない) R³ および R⁴ は水素原子または炭素数1～4のアルキル基を表し、Qは無置換もしくは置換基を有するフェニル基、ビリジル基、ビリダジル基、ビリミジル基、ピラジル基、チエニル基、フリル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、イソチアゾリル基、イソオキサゾリル基、トリアゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジル基、ナフチル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、ベンゾチエニル基、ベンズオキサゾリル基またはベンズチアゾリル基を表し、置換基としては、ハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数

で表される 3(2H) -ピリダジノン誘導体の1種または2種以上を有効成分として含有することを特徴とする農園芸用殺虫、殺ダニ、殺線虫および動物に寄生するダニの駆除剤。

(式中、Rは炭素数1～6のアルキル基を表し、Aはハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のアルキルチオ基または水素原子を表し、Xは酸素原子または硫黄原子を表し、R¹ および R² は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1～4のアル

キル基を表し、Bは、 $\begin{array}{c} R^3 \quad R^4 \\ | \quad | \\ -C=C- \end{array}$ を表し、R³ および R⁴ は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1～4のアルキル基を表し、mは0または1を表し、R⁵ はハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のハロアルキル基またはニトロ基を表し、

nは0、1～4の整数を表し、Yは $\begin{array}{c} R^7 \\ | \\ -OCH- \end{array}$ 、



1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のハロアルキル基、炭素数1～4のアルキルチオ基、アルキルスルホニル基またはニトロ基より選ばれる。)

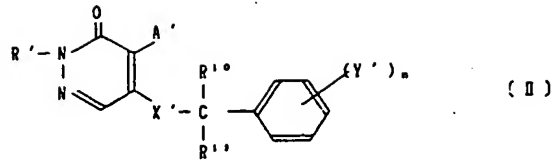
3. 発明の詳細な説明

(産業上の利用分野)

本発明は新規な 3(2H) -ピリダジノン誘導体および該誘導体を有効成分として含有する農園芸用殺虫、殺ダニ、殺線虫および動物に寄生するダニの駆除剤に関するものである。

(従来の技術)

本発明者らは、先に下記的一般式(II)で表される一部の 3(2H) -ピリダジノン誘導体が農園芸用殺虫、殺ダニ、殺線虫、殺菌作用を有することを見出した。(ヨーロッパ公開特許第0088384号公報、ヨーロッパ公開特許第0134439号公報およびヨーロッパ公開特許第0183212号公報参照)

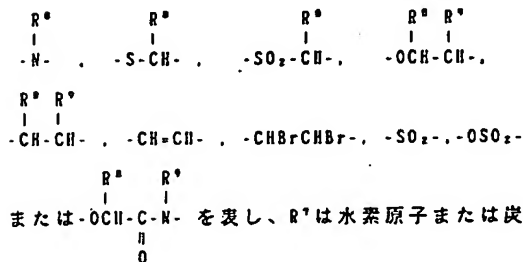


(式中、例えばR'はアルキル基、A'はハロゲン原子、R''およびR'''は水素原子または低級アルキル基、X'は酸素原子もしくは硫黄原子、Y'は低級アルキル基、シクロアルキル基、低級アルコキシ基、低級ハロアルキル基、低級ハロアルコキシ基、置換フェニル基などを示す。)

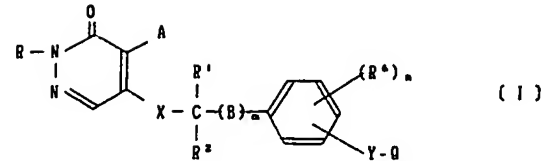
後記一般式(1)で表される本発明化合物は、一般式(II)で表される従来技術に包含されない新規化合物であり、優れた殺虫、殺ダニ、殺線虫作用を有し、農園芸上有害な生物を有効に防除できることを見出し、本発明を完成した。この効果については後述する試験例に明示してある。

(発明の態様)

本発明は、一般式(1)：



炭素数1～4のアルキル基を表し、(但し、Qがフェニル基のとき水素原子は含まない)R'およびR''は水素原子または炭素数1～4のアルキル基を表し、Qは無置換もしくは置換基を有するフェニル基、ピリジル基、ピリダジリル基、ピリミジル基、ピラジリル基、チエニル基、フリル基、ピロリル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、チアゾリル基、オキサゾリル基、イソチアゾリル基、イソオキサゾリル基、トリアゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジリル基、ナフチル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、ベンゾチエニル基、ベンズオキサゾリル基または



(式中、Rは炭素数1～6のアルキル基を表し、Aはハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のアルキルチオ基または水素原子を表し、Xは酸素原子または硫黄原子を表し、R'およびR''は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1～4のアル

キル基を表し、Bは、 $\begin{matrix} R^3 & R^4 \\ | & | \\ -C & =C- \end{matrix}$ を表し、R³およびR⁴は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1～4のアルキル基を表し、mは0または1を表し、R⁵はハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のハロアルキル基またはニトロ基を表し、

nは0、1～4の整数を表し、Yは $\begin{matrix} R^7 \\ | \\ -OCH- \end{matrix}$ 、

ベンズチアゾリル基を表し、置換基としては、ハロゲン原子、炭素数1～4のアルキル基、炭素数1～4のアルコキシ基、炭素数1～4のハロアルキル基、炭素数1～4のアルキルチオ基、アルキルスルホニル基またはニトロ基より選ばれる。)で表される3(2H)-ピリダジノン誘導体ならびに該誘導体を有効成分として含有する農園芸用殺虫、殺ダニ、殺線虫および動物に寄生するダニの駆除剤に関するものである。

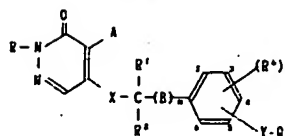
本発明に包含される化合物としては、具体的には例えば第1表に示す化合物が挙げられる。但し、第1表に示す化合物は例示のためのものであって、本発明は、これらのみに限定されるものではない。〔但し、第1表中、Meはメチル基を、Etはエチル基を、Prはプロピル基を、Buはブチル基を、tはターシャリーを、sはセカンダリーを、iはイソを示す。〕

なお、本発明に包含される化合物の中で不斉炭素原子を有する化合物の場合には、光学活性な化合物の(+)体および(-)体も含むものである。

第1表に示す化合物の番号は、後に記載する製造例、製剤例および試験例において参照される。

(以下、余白)

第1表



No.	R	X	A	R' -C(R)- R''	(R*)	Y-O
1	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
2	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
3	t-Bu	S	Me	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
4	t-Bu	S	MeS	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
5	t-Bu	O	MeO	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
6	t-Bu	S	MeO	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
7	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
8	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
9	t-Bu	S	Br	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
10	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
11	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
12	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
13	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
14	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
15	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
16	t-Bu	O	Me	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
17	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
18	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
19	t-Bu	O	Br	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
20	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
21	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
22	Et	O	Cl	CH ₃	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
23	Et	S	Cl	CH ₃	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅

24	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
25	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
26	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
27	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
28	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	3-OCN(Pr)C ₆ H ₅
29	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	3-OCN(Pr)C ₆ H ₅
30	Et	O	Cl	CH ₃	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
31	Et	S	Cl	CH ₃	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
32	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Br-4
33	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
34	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
35	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-2
36	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-2
37	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -F-4
38	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -OHe-4
39	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -CF ₃ -3
40	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-3
41	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-3
42	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-4
43	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-4
44	t-Bu	O	Cl	CH ₃	5-Cl	2-OCN(He)C ₆ H ₅
45	t-Bu	S	Cl	CH ₃	5-Cl	2-OCN(He)C ₆ H ₅
46	t-Bu	O	Cl	CH ₃	5-Cl	2-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
47	t-Bu	S	Cl	CH ₃	5-Cl	2-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
48	t-Bu	S	Cl	CH ₃	5-Br	2-OCN(He)C ₆ H ₅
49	t-Bu	O	Cl	CH ₃	3-MeO	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
50	t-Bu	S	Cl	CH ₃	3-MeO	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
51	t-Bu	O	Cl	CH ₃	3-NO ₂	4-OCN(He)C ₆ H ₅
52	t-Bu	S	Cl	CH ₃	3-NO ₂	4-OCN(He)C ₆ H ₅
53	t-Bu	O	Cl	CH ₃	3-NO ₂	6-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
54	t-Bu	S	Cl	CH ₃	3-NO ₂	6-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
55	t-Bu	O	Cl	CH ₃ -CH-CH	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
56	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -CH-CH	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-4
57	t-Bu	O	Cl	CH ₃ -CH-CH	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
58	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -CH-CH	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
59	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -C(He)-CH	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
60	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -C(He)-CH	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
61	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -C(He)-CH	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅

62	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -C(He)-CH	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
63	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -C(He)-CH	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-4
64	t-Bu	S	Cl	CH ₃ -C(He)-CH	H	4-OCN(Pr)C ₆ H ₅
65	t-Bu	O	Cl	CH(He)	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
66	t-Bu	S	Cl	CH(He)	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅
67	t-Bu	S	Cl	CH(He)	H	3-OCN(He)C ₆ H ₅
68	t-Bu	S	Cl	CH(He)	H	2-OCN(He)C ₆ H ₅
69	t-Bu	S	Cl	CH(He)	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -Cl-4
70	t-Bu	S	Cl	CH(He)	H	4-OCN(He)C ₆ H ₅ -He-4
71	t-Bu	S	Cl	CH(He)	2-MeO, 3-Me	4-OCN(He)C ₆ H ₅
72	t-Bu	S	Cl	CH(He)	5-F	2-OCN(He)C ₆ H ₅
73	t-Bu	S	Cl	CH(He)	3-Me	4-OCN(He)C ₆ H ₅
74	t-Bu	S	Cl	CH(He)	5-Me	2-OCN(He)C ₆ H ₅
75	t-Bu	S	Cl	CH(He)	5-CF ₃	2-OCN(He)C ₆ H ₅
76	t-Bu	S	Cl	CH(He)	6-CF ₃	2-OCN(He)C ₆ H ₅
77	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
78	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
79	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
80	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
81	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
82	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
83	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CH ₃ C ₆ H ₅
84	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅
85	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅
86	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅
87	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -He-4
88	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -He-4
89	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -He-4
90	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -Cl-4
91	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -Cl-4
92	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -Bu-t-4
93	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -Bu-t-4
94	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OSO ₂ C ₆ H ₅ -NO ₂ -4
95	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CON(He)C ₆ H ₅
96	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CON(He)C ₆ H ₅
97	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCN ₂ CON(He)C ₆ H ₅
98	t-Bu	S	Me	CH ₃	H	4-OCN ₂ CON(He)C ₆ H ₅
99	t-Bu	S	MeS	CH ₃	H	4-OCN ₂ CON(He)C ₆ H ₅

100	1-Bu	S	MeO	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
101	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
102	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
103	1-Bu	S	Cl	CH ₂ CH-CH	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
104	1-Bu	S	Cl	CH ₂ CH-CH	H	3-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
105	1-Bu	S	Cl	CH ₂ CH-CH	H	2-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
106	1-Bu	S	Cl	CH ₂ C(Me)-CH	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
107	1-Bu	S	Cl	CH ₂ C(Me)-CH	H	3-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
108	1-Bu	S	Cl	CH ₂ C(Me)-CH	H	2-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
109	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
110	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
111	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
112	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CONHC ₆ H ₅
113	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Et)C ₆ H ₅
114	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Et)C ₆ H ₅
115	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
116	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
117	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
118	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
119	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
120	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
121	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-CHBrCHBrC ₆ H ₅
122	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-CHBrCHBrC ₆ H ₅
123	Et	O	Cl	CH ₂	H	4-CHBrCHBrC ₆ H ₅
124	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-CHBrCHBrC ₆ H ₅
125	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
126	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
127	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
128	1-Bu	S	Me	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
129	1-Bu	S	MeS	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
130	1-Bu	S	MeO	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
131	1-Bu	S	H	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
132	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
133	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
134	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
135	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
136	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
137	1-Bu	S	MeO	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅

138	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
139	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
140	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
141	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
142	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
143	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
144	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
145	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ C ₆ H ₅
146	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-NHC ₆ H ₅
147	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-NHC ₆ H ₅
148	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
149	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
150	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
151	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
152	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
153	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
154	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
155	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
156	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
157	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
158	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
159	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
160	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
161	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
162	Et	O	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
163	Et	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
164	1-Bu	S	Cl	CH ₂ CH-CH	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
165	1-Bu	S	Cl	CH ₂ C(Me)-CH	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
166	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Et)C ₆ H ₅
167	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Et)C ₆ H ₅
168	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Et)C ₆ H ₅
169	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Et)C ₆ H ₅
170	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
171	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
172	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
173	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
174	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
175	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅

176	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-N(Me)C ₆ H ₅
177	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
178	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-N(Me)C ₆ H ₅
179	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
180	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
181	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
182	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
183	Et	O	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
184	Et	S	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
185	1-Bu	S	Cl	CH ₂ CH-CH	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
186	1-Bu	S	Cl	CH ₂ C(Me)-CH	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
187	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-SCN ₂ C ₆ H ₅
188	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-SCN ₂ C ₆ H ₅
189	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
190	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
191	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
192	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
193	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
194	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SCN ₂ C ₆ H ₅
195	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
196	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
197	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
198	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
199	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
200	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
201	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
202	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
203	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
204	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
205	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
206	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
207	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OSO ₂ C ₆ H ₅
208	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OSO ₂ C ₆ H ₅
209	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OSO ₂ C ₆ H ₅
210	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
211	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
212	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
213	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅

214	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-NHC ₆ H ₅
215	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-NHC ₆ H ₅
216	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
217	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
218	1-Bu	O	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
219	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
220	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
221	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
222	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
223	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-NHC ₆ H ₅
224	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-NHC ₆ H ₅
225	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
226	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
227	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
228	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
229	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
230	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
231	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-N(Me)C ₆ H ₅
232	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SCN ₂ C ₆ H ₅
233	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SCN ₂ C ₆ H ₅
234	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
235	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
236	1-Bu	S	Br	CH ₂	3-Me	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
237	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
238	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
239	1-Bu	S	Cl	CH ₂	3-Me	4-SD ₂ CH ₂ C ₆ H ₅
240	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
241	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
242	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
243	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
244	1-Bu	O	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
245	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
246	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
247	Et	O	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
248	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
249	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
250	1-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅
251	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB ₂ CON(Me)C ₆ H ₅

252	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,04
253	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,04
254	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,05
255	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,05
256	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,06
257	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,06
258	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,06
259	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,06
260	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,07
261	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,08
262	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,08
263	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,08
264	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,08
265	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,08
266	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,08
267	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,09
268	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,09
269	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,09
270	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,09
271	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,09
272	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,010
273	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,010
274	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,010
275	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,010
276	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,010
277	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,010
278	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,010
279	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,011
280	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,011
281	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,012
282	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,012
283	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,013
284	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,013
285	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,014
286	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,014
287	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,015
288	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,015
289	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,016

290	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,016
291	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,017
292	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,017
293	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-OCB,017
294	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,017
295	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,017
296	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,017
297	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,017
298	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,017
299	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,018
300	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,018
301	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,019
302	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,019
303	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,020
304	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,020
305	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,020
306	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB,020
307	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,020
308	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,020
309	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,021
310	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,021
311	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,022
312	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,022
313	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,023
314	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,023
315	1-Bu	0	Br	CH ₂	H	4-OCB,023
316	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB,023
317	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	2-OCB,023
318	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,023
319	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	3-OCB,023
320	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-OCB,023
321	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,023
322	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,023
323	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,023
324	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,023
325	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	2-OCB,023
326	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,024
327	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,024

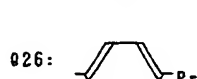
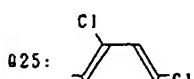
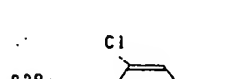
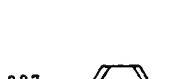
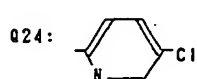
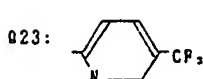
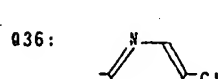
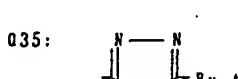
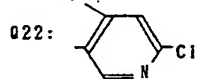
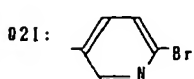
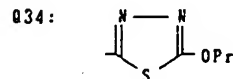
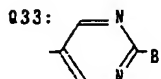
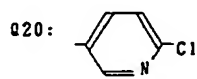
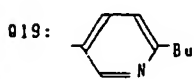
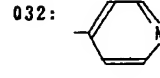
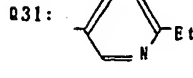
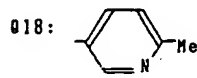
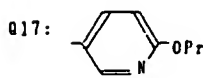
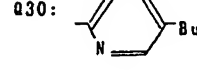
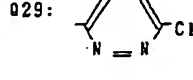
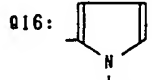
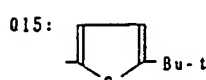
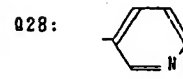
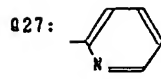
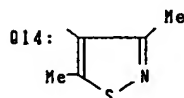
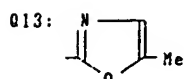
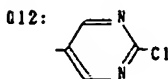
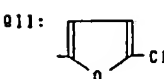
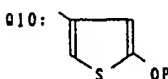
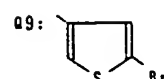
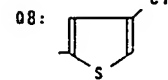
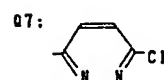
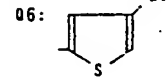
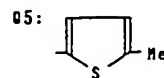
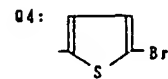
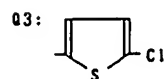
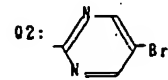
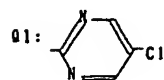
328	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,025
329	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,025
330	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,026
331	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,026
332	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,027
333	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,027
334	1-Bu	0	Br	CH ₂	H	4-OCB,027
335	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB,027
336	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	2-OCB,027
337	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,027
338	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	3-OCB,027
339	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	3-OCB,027
340	Me	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,027
341	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,027
342	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,027
343	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,027
344	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,028
345	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,028
346	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,029
347	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,029
348	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,030
349	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,030
350	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,031
351	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,031
352	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,031
353	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,031
354	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,031
355	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,031
356	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,032
357	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,032
358	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,032
359	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,032
360	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB,032
361	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,032
362	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,032
363	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,033
364	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,033
365	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,034

366	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,034
367	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,035
368	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,035
369	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,036
370	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,036
371	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,037
372	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,037
373	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,038
374	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,038
375	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,038
376	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,038
377	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB,038
378	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,038
379	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,038
380	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,038
381	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	3-OCB,038
382	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	2-OCB,038
383	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,039
384	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,039
385	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,040
386	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,040
387	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,041
388	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,041
389	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,042
390	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,042
391	Et	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,042
392	Et	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,042
393	1-Bu	S	Br	CH ₂	H	4-OCB,042
394	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	2-OCB,042
395	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,042
396	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,043
397	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,043
398	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,043
399	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,043
400	1-Bu	0	Cl	CH ₂	H	4-OCB,044
401	1-Bu	S	Cl	CH ₂	H	4-OCB,044
402	1-Bu	0	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,044
403	1-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCB,044

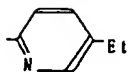
404	t-Bu	O	Cl	CH ₃	0	4-OCF ₃ ,045
405	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,045
406	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,045
407	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,045
408	t-Bu	S	Br	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,045
409	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	2-OCF ₃ ,045
410	t-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCF ₃ ,045
411	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,046
412	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,046
413	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,046
414	t-Bu	S	Br	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,046
415	t-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCF ₃ ,046
416	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,047
417	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,047
418	Et	O	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,047
419	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,047
420	t-Bu	S	Br	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,047
421	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	2-OCF ₃ ,047
422	t-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCF ₃ ,047
423	t-Bu	O	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,048
424	t-Bu	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,048
425	Et	S	Cl	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,048
426	t-Bu	S	Br	CH ₃	H	4-OCF ₃ ,048
427	t-Bu	O	Cl	CH(Me)	H	4-OCF ₃ ,048
428	t-Bu	S	Cl	CH(Me)	H	4-OCF ₃ ,048

(以下、余白)

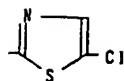
第1表中の01~048は、次の構造式で表される基である。



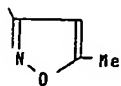
Q39:



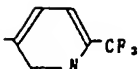
Q40:



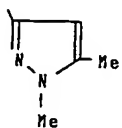
Q41:



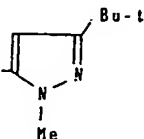
Q42:



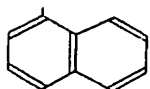
Q43:



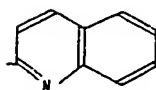
Q44:



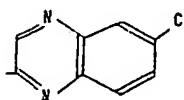
Q45:



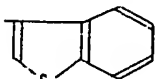
Q46:



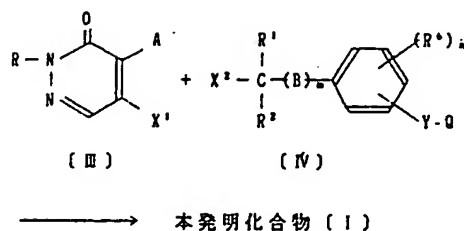
Q47:



Q48:



本発明化合物は、次の反応式に従って製造できる。



(式中、R, R', R'', R'', A, B, Y, Q, m および n は前記と同じ意味を表し、X' はハロゲン原子、-OH または -SH を表し、X'' はハロゲン原子、-OH または -SH を表す。但し、X' がハロゲン原子の場合は X'' は -OH または -SH を表し、X'' が -OH または -SH の場合は X'' はハロゲン原子を表す。)

すなわち本発明化合物 (I) は、原料のひとつである前記式 (III) で表される 3(2H)-ピリダジノン誘導体と、もう一方の原料である前記式 (IV) で表される化合物とをハロゲン化水素吸収

剤の存在下で反応に影響しない溶媒中で反応させることによって製造できる。本発明において溶媒としては低級アルコール類 (例えばメタノール、エタノール等)、ケトン類 (例えば、アセトン、メチルエチルケトン等)、炭化水素類 (例えば、ベンゼン、トルエン等)、エーテル類 (例えば、イソプロピルエーテル、テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサン等)、アミド類 (例えば、N,N-ジメチルホルムアミド、ヘキサメチルホスホリクトリアミド等)、ハロゲン化炭化水素類 (例えばジクロロメタン、ジクロロエタン等) が使用することができる。また必要に応じて、これらの溶媒と水との混合溶媒も使用することができる。

ハロゲン化水素吸収剤としては、無機塩基 (例えば、水素化ナトリウム、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸水素ナトリウム等) および有機塩基 (例えば、ナトリウムメトキサイド、ナトリウムエトキサイド、トリエチルアミン、ピリジン等) を用いることができる。また、必要に応じて、反応系にテト

ラアンモニウム塩 (例えば、テトラ-n-ブチルアンモニウムブロマイド、トリエチルベンジルアンモニウムクロライド等) を触媒として添加してもよい。反応温度としては、室温から、反応に使用する溶媒の沸点までの範囲をとることができる。原料のモル比は任意に設定できるが、等モルまたは、それに近い比率で反応を行うのが有利である。

次に本発明化合物の製造方法について製造例を具体的に挙げて説明するが、本発明はこれらのみに限定されるものではない。

製造例 1

2-tert-ブチル-4-クロロ-5-[4-(1-(4-クロロフェニル)エチルオキシ)ベンジルチオ]-3(2H)-ピリダジノンの合成

(化合物 No. 34)

2-tert-ブチル-4-クロロ-5-メルカプト-3(2H)-ピリダジノン (2.2 g) および 4-(1-(4-クロロフェニル)エチルオキシ)ベンジルクロライド (2.8 g) を N,N-ジメチルホルムアミド (30 ml) に溶解し、無水炭酸カ

リウム (2.8 g) を加え室温にて10時間攪拌した。この溶液を水に注ぎベンゼンで抽出し、水洗、無水硫酸ナトリウムで乾燥後、減圧下で溶媒を留去し、得られた結晶をヘキサンにて再結晶し、標記目的物 (3.0 g) を得た。融点148.8 - 151.3 °C

製造例 2

2-ヒープチル-4-クロロ-5-(4-(2-フェニルエチルオキシ)ベンジルオキシ)-3(2H)-ビリダジノンの合成 (化合物No 77)

4-(2-フェニルエチルオキシ)ベンジルアルコール (1.3 g) をN,N-ジメチルホルムアミド (10 ml) に溶解し、5.5%水素化ナトリウム (0.4 g) を加えた。10分後に2-ヒープチル-4,5-ジクロロ-3(2H)-ビリダジノン (1.3 g) を加え室温にて一昼夜攪拌した。この溶液を水に注ぎベンゼンで抽出し、水洗、無水硫酸ナトリウムで乾燥後、減圧下で溶媒を留去し、得られた油状物を分取用薄層クロマトグラフィーで分離、精製し、標記目的物 (0.9 g) を得た。油状物

4.02 (s, 2H)、4.18 (s, 2H)、7.1 - 7.3 (m, 9H)、7.50 (s, 1H)

製造例 4

2-ヒープチル-4-クロロ-5-(2-(ベンジルチオ)ベンジルオキシ)-3(2H)-ビリダジノンの合成 (化合物No 179)

2-ヒープチル-4-クロロ-5-ヒドロキシ-3(2H)-ビリダジノン (1.1 g) および2-(ベンジルチオ)ベンジルクロライド (1.3 g) をN,N-ジメチルホルムアミド (30 ml) に溶解し、無水炭酸カリウム (1.0 g) を加え、110 - 115 °C に加熱し4時間攪拌した。この溶液を水に注ぎベンゼンで抽出し、水洗、無水硫酸ナトリウムで乾燥後、減圧下で溶媒を留去し、得られた結晶 (2.13 g) をヘキサンにて再結晶し、標記目的物 (1.77 g) を得た。

融点94.6 - 97.1 °C

次に製造例1~4の方法に準じて製造した化合物の製造例を第2表に記載した。化合物の番号は第1表に対応する。

NMR (δ値) : 1.58 (s, 9H)、2.8 - 3.1 (m, 2H)、3.9 - 4.2 (m, 2H)、5.05 (s, 2H)、6.7 - 7.3 (m, 9H)、7.63 (s, 1H)

製造例 3

2-ヒープチル-4-クロロ-5-(2-(ベンジルチオ)ベンジルチオ)-3(2H)-ビリダジノンの合成 (化合物No 180)

2-ヒープチル-4-クロロ-5-メルカプト-3(2H)-ビリダジノン (1.2 g) および2-(ベンジルチオ)ベンジルクロライド (1.3 g) をN,N-ジメチルホルムアミド (30 ml) に溶解し、無水炭酸カリウム (1.0 g) を加え、室温から40 °C の温度で4時間攪拌した。この溶液を水に注ぎベンゼンで抽出し、水洗、無水硫酸ナトリウムで乾燥後、減圧下で溶媒を留去し、得られた油状物 (2.54 g) を分取用薄層クロマトグラフィー (展開液: ベンゼン/酢酸エチル = 20/1 v/v) で分離、精製した。油状の標記目的物 (2.22 g) を得た。

$n_D^{20} = 1.6182$ 、NMR (δ値) : 1.59 (s, 9H)、

第 2 表

化合物No	融点 (°C)	化合物No	融点 (°C)
14	94.8 - 98.7	120	181.1 - 184.4
15	88.8 - 97.8	122	(油状物)
18	(油状物)	125	189 - 199
33	143.4 - 146.7	157	118.8 - 121.1
34	148.8 - 151.3	179	94.6 - 97.1
77	(油状物)	180	(油状物)
78	109.4 - 111.1	196	168 - 170
87	107 - 111	332	163 - 169
95	(油状物)	400	120 - 124

(以下、余白)

本発明化合物を農園芸用殺虫、殺ダニ、殺線虫、および動物に寄生するダニの駆除剤として使用するにあたっては、一般には適当な担体、例えばクレー、タルク、ベントナイト、珪藻土等の固体担体あるいは水、アルコール類（メタノール、エタノール等）、芳香族炭化水素類（ベンゼン、トルエン、キシレン等）、塩素化炭化水素類、エーテル類、ケトン類、エステル類（酢酸エチル等）、酸アミド類（ジメチルホルムアミド等）などの液体担体と混用して適用することができ、所望により乳化剤、分散剤、懸濁剤、浸透剤、展着剤、安定剤などを添加し、液剤、乳剤、水和剤、粉剤、粒剤、フロアブル剤等任意の剤型にて実用に供することができる。また、必要に応じて製剤または散布時に他種の除草剤、各種殺虫剤、殺菌剤、植物生長調節剤、共力剤などと混合施用してもよい。本発明化合物の施用量は適用場面、施用時期、施用方法、対象病害虫、栽培作物等により差異はあるが一般には有効成分量としてヘクタール当たり0.005～50kg程度が適当である。

；ジークライト工業㈱商品名)

ソルボール5039 4部

(アニオン性界面活性剤

；東邦化学工業㈱商品名)

カーブレックス#80 3部

(ホワイトカーボン：塩野義製薬㈱商品名)

リグニンスルホン酸カルシウム 2部

以上を均一に混合粉碎して水和剤とする。

使用に際しては上記水和剤を50～20000倍に希釈して有効成分量がヘクタール当たり0.005～50kgになるように散布する。

製剤例3 油 剤

本発明化合物 10部

メチルセルソルブ 90部

以上を均一に混合して油剤とする。使用に際して上記油剤を有効成分量がヘクタール当たり0.005～50kgになるように散布する。

製剤例4 粉 剤

本発明化合物 3.0部

カーブレックス#80 0.5部

次に本発明化合物を有効成分とする殺虫、殺ダニ、殺線虫剤および動物に寄生するダニの駆除剤の製剤例を示すがこれらのみに限定されるものではない。なお、以下の製剤例において「部」は重量部を意味する。

製剤例1 乳 剤

本発明化合物 20部

キシレン 55部

N,N-ジメチルホルムアミド 20部

ソルボール2680 5部

(非イオン性界面活性剤とアニオン性界面活性剤との混合物：東邦化学工業㈱商品名)

以上を均一に混合して乳剤とする。使用に際しては上記乳剤を50～20000倍に希釈して有効成分量がヘクタール当たり0.005～50kgになるように散布する。

製剤例2 水和剤

本発明化合物 25部

ジークライトPFP 66部

(カオリナイトとセリサイトの混合物

(ホワイトカーボン：塩野義製薬㈱商品名)

クレー 95部

リン酸ジイソプロピル 1.5部

以上を均一に混合粉碎して粉剤とする。使用に際して上記粉剤を有効成分量がヘクタール当たり0.005～50kgになるように散布する。

製剤例5 粒 剤

本発明化合物 5部

ベントナイト 54部

タルク 40部

リグニンスルホン酸カルシウム 1部

以上を均一に混合粉碎して少量の水を加えて攪拌混合し、押出式造粒機で造粒し、乾燥して粒剤とする。使用に際して上記粒剤を有効成分量がヘクタール当たり0.005～50kgになるように散布する。

製剤例6 フロアブル剤

本発明化合物 25部

ソルボール3353 10部

(非イオン性界面活性剤：東邦化学工業㈱商品名)

ルノックス 1000C 0.5 部
 (陰イオン界面活性剤: 東邦化学工業(株)商品名)
 1%ザンサンガム水溶液 20 部
 (天然高分子)

水 44.5 部

有効成分(本発明化合物)を除く上記の成分を均一に溶解し、ついで本発明化合物を加えよく攪拌した後、サンドミルにて湿式粉碎してフロアブル剤を得る。使用に際しては、上記フロアブル剤を50~20000倍に希釈して有効成分量がヘクタール当たり0.005~50kgになるように散布する。

本発明化合物は、ツマグロヨコバイ等の半翅目害虫、コナガ等の鱗翅目害虫、鞘翅目害虫、アカイエカ等の衛生害虫に卓越した殺虫力を有するとともに、果樹および蔬菜に寄生する種々のダニ、例えば、ナミハダニ、カンザワハダニ、ニセナミハダニ、ミカンハダニ、リンゴハダニ等および動物に寄生するダニ例えば、オウシマダニ、ブーフラス・アニユレイタス、アンブリオンマ・マクレイタム、リビセファラス・アペンディクラータ

ス、フクトゲチマダニ等の防除にも有効である。また、果樹および蔬菜に寄生する種々のセンチュウ例えば、ネコブセンチュウ、ネグサレセンチュウ、シストセンチュウなどの防除にも有効である。また、牛、馬、羊、豚などの家畜類、家禽類、および犬、猫、うさぎなどの動物に寄生するダニの駆除剤としても優れている。

以下の試験例において具体的に説明する。

(以下、余白)

試験例1 ツマグロヨコバイに対する殺虫試験

本発明化合物を含有する乳剤を水で希釈し、1000ppm 濃度の薬液を調整した。この薬液中にイネの茎葉を約10秒間浸漬し、この茎葉をガラス円筒に入れ、有機リン系殺虫剤に抵抗性を有するツマグロヨコバイ成虫10頭を放ち、孔のあいたプラスチック製蓋をかぶせた。この円筒を25℃の恒温室に収容し、96時間経過後の死虫率を下記の計算式から求めた。

なお、試験は2区制で行なった。

$$\text{死虫率}(\%) = \frac{\text{死虫数}}{\text{放虫数}} \times 100$$

その結果、以下の化合物が100%の死虫率を示した。

本発明化合物 No.18、No.77、No.78、
 No.157

試験例2 ニジュウヤホシテントウに対する接触性殺虫試験

本発明化合物を含有する乳剤を水で希釈し、1000ppm 濃度の薬液を調整した。この薬液中にトマトの葉を約10秒間浸漬し、風乾後シャーレに入れ、この中にニジュウヤホシテントウ2令幼虫をシャーレ当たり10頭を放虫し、孔のあいた蓋をして25℃恒温室に収容し、96時間経過後の死虫率を下記の計算式から求めた。なお、試験は2区制で行なった。

$$\text{死虫率}(\%) = \frac{\text{死虫数}}{\text{放虫数}} \times 100$$

その結果、以下の化合物が100%の死虫率を示した。

本発明化合物 No.15、No.33、No.34、No.77
 No.78、No.122、No.157、No.332

試験例 3 カンザワハダニに対する殺ダニ
効力試験

インゲンの葉をリーフパンチを用いて径 1.5cm の円形に切り取り、径 7cm のスチロールカップ上の湿った濾紙上に置いた。これにカンザワハダニ幼虫を 1 葉当たり 10 頭接種した。接種半日後に本発明化合物を含有する乳剤を、展着剤を加えた水で希釈して 1000ppm 濃度の薬液を調整した。この薬液をスチロールカップ当たり 2ml ずつ回転式散布塔を用いて散布し、96 時間経過後の死虫率を下記の計算式から求めた。なお、試験は 2 区制で行なった。

$$\text{死虫率 (\%)} = \frac{\text{死虫数}}{\text{放虫数}} \times 100$$

その結果、以下の化合物が 100% の死虫率を示した。

本発明化合物 No.18、No.77、No.78、No.87

試験例 4 ネコブセンチュウに対する殺線虫
効力試験

ネコブセンチュウの汚染土壌を径 8cm のスチロールカップ上に入れた。本発明化合物を含有する乳剤を、展着剤を加えた水で希釈して 1000ppm 濃度の薬液を調整した。この薬液をスチロールカップ当たり 50ml ずつ土壌に灌注した。48 時間経過後に指標作物のトマト苗を移植した。移植 30 日経過後トマトの根を水洗して、ネコブの寄生の見取り調査を行った。

なお、試験は 2 区制で行なった。

その結果、以下の化合物は、ネコブがほとんど認められず、強い殺線虫活性を呈することがわかった。

本発明化合物 No.95

特許出願人 日産化学工業株式会社

第 1 頁の続き

⑤Int.Cl. ⁴	識別記号	庁内整理番号
C 07 D 403/12	2 3 1	6761-4C
	2 3 7	6761-4C
405/12	2 3 7	6761-4C
409/12	2 3 7	6761-4C
413/12	2 3 7	6761-4C
417/12	2 3 7	6761-4C